

学校编号: 10384

分类号 _____ 密级 _____

学 号: 19120081152728

UDC _____

硕 士 学 位 论 文

三交叉多面体链环的计数

Enumerating the 3-crossing polyhedral links

邓 科 财

指导教师姓名: 钱建国 教授

专 业 名 称: 计 算 数 学

论文提交日期: 2011 年 4 月

论文答辩日期: 2011 年 5 月

学位授予日期: 2011 年 6 月

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2011 年 5 月

厦门大学学位论文原创性声明

兹呈交的学位论文，是本人在导师指导下独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考的其它个人或集体的研究成果，均在文中以明确方式标明。本人依法享有和承担由此论文而产生的权利和责任。

责任人（签名）：

年 月 日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人完全了解厦门大学有关保留、使用学位论文的规定。厦门大学有权保留并向国家主管部门或其指定机构送交论文的纸质版和电子版，有权将学位论文用于非赢利目的的少量复制并允许论文进入学校图书馆被查阅，有权将学位论文的内容编入有关数据库进行检索，有权将学位论文的标题和摘要汇编出版。保密的学位论文在解密后适用本规定。

本学位论文属于

- 1、保密(),在 年解密后适用本授权书。
- 2、不保密(),适用本授权书。

(请在以上相应括号内打“√”)

作者签名: _____ 日期: _____ 年 月 日

导师签名: _____ 日期: _____ 年 月 日

目 录

中文摘要	i
英文摘要	ii
第 1 章 引言	1
第 2 章 主要结果	5
2.1 三交叉多面体链环计数的一般理论和方法	5
2.2 三交叉正四面体、六面体、十二面体链环的计算结果	18
第 3 章 结语	41
参考文献	43
致 谢	46

Contents

Abstract(in Chinese)	i
Abstract(in English)	ii
Chapter 1 Introduction	1
Chapter 2 Main results	5
2.1 Enumerating 3-crossing polyhedral links	5
2.2 Numerical results for 3-crossing tetrahedron, cube, and dodecahedral links	18
Chapter 3 Conclusion remark	41
References	43
Acknowledgement	46

摘要

三交叉多面体链环是指具有三正则多面体支架结构的链环, 其每一个面由一个单环构成, 在多面体的顶点处所关联的三个单环以锁扣方式 (包括左手三叶锁扣和右手三叶锁扣) 交叉结合在一起. 三交叉多面体链环因存在于一些生物分子中 (如 HK 噬菌体蛋白质外壳支架链环) 而受到研究者的关注. 生物化学家主要研究三交叉多面体链环的生化性质及人工合成问题, 数学家则研究它的拓扑性质. 本文研究与生物背景密切相关的三交叉多面体的计数问题, 即: 由两种不同锁扣方式的顶点及若干种不同分子单环构成的三交叉多面体的计数问题, 主要结果如下:

1. 运用 Pólya 计数理论给出了三交叉多面体链环计数及其手性计数问题的一般理论方法;
2. 给出了三交叉正四面体、正六面体和正十二面体链环的具体计数结果, 从结果可看出: 几乎所有的正四面体、正六面体和正十二面体链环都是有手性的.

关键词: 三交叉多面体链环, 手性, 计数

Abstract

3-crossing polyhedral links are links which has polyhedral skeleton frame in which each face consists of a single ring and at each vertex the three corresponding rings are linked in two locking patterns: the right-hand locking pattern and the left-hand locking pattern. 3-crossing polyhedral links exist in many biomolecules such as HK bacteriophage protein capsid skeleton links. Research interests of biologists and mathematicians on 3-crossing polyhedral links focus mainly on their biochemical properties, synthesizing techniques and topological properties, respectively.

This dissertation studies the problem of enumerating 3-crossing polyhedral links with two locking patterns of vertices and m types of rings. The main results are as follows, in which the famous Pólya's enumerating theory plays an important role:

1. A theoretical technique for counting the number of 3-crossing polyhedral links is established;
2. The numerical results for 3-crossing tetrahedron links, cube links and dodecahedral links are given. The results shows that almost all these three types of the 3-crossing polyhedral links, roughly speaking, are chiral.

Key words: 3-crossing polyhedral links, chirality, enumeration

第 1 章 引言

研究发现,许多生物分子具有多面体链环(又称索烃)形状,如成熟的 HK 噬菌体蛋白质外壳支架,由分支数为 72 的链环,折叠锁扣构成 72 面体支架形状 [23]. 它含 12 个正五边形分支, 60 个正六边形分支,在每个角点处,相邻的三个分支以三叶锁扣方式锁扣在一起,构成一个薄但却稳定的三交叉多面体链环外壳支架,见图 1.

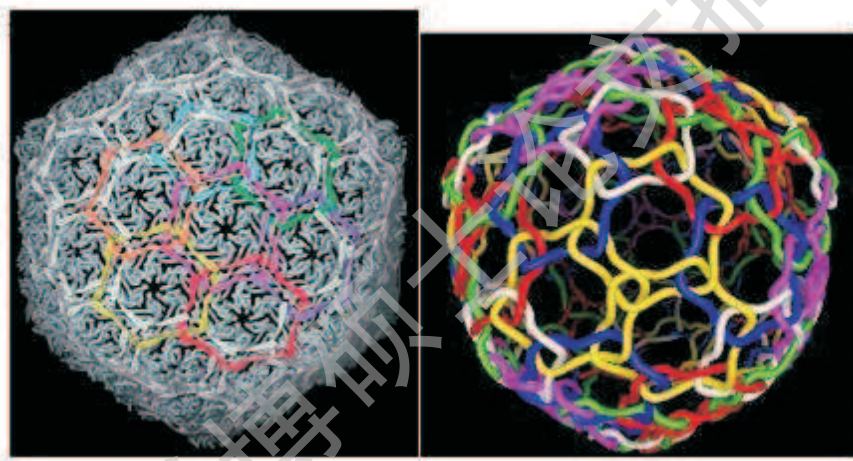


图 1 HK 噬菌体多面体外壳支架

多面体链环的几何特征和锁扣方式引起了生物化学家和数学家们的兴趣. 生物化学家们利用不同的材料和方式人工合成了一些多面体链环,其中 Goodman, Seeman 等利用 DNA 自组装合成了 DNA 正四面体 [7-8], DNA 正六面体 [4], 和 DNA 正八面体 [20]. 邱等在理论上探讨了三交叉多面体链环的构造,并讨论不同构造的转换关系. 他们所讨论的三交叉多面体链环和 HK 噬菌体蛋白质外壳支架三交叉多面体链环在锁扣方式上是一样的 [16], 见图 2.

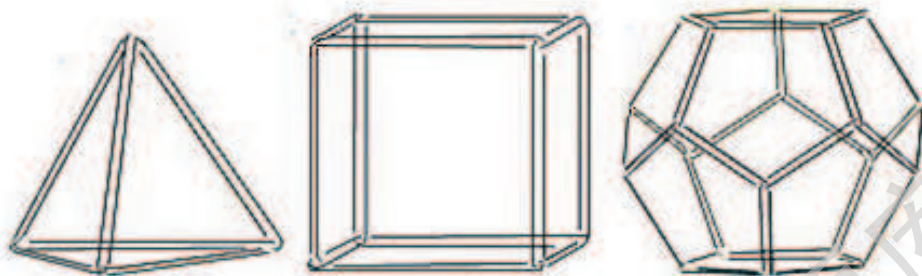


图 2 三交叉正四面体、正六面体、正十二面体链环

本文研究三交叉多面体的计数问题, 即: 给定一定种类数的分子材料链 (如闭合 DNA 链或闭合蛋白质链), 以角点锁扣方式 (包括左手三叶锁扣和右手三叶锁扣) 构成三交叉多面体链环, 求其不等价结构数. 其中, 两个形状相同的三交叉多面体链环 L_1 和 L_2 等价, 分为包括手性 [15] 和不包括手性 [15] 两种情形: (1) **包括手性, 是指在该等价定义下, 互为手性的两个多面体链环是不等价的.** 具体定义如下, L_1 和 L_2 等价, 当且仅当固定 L_1 (或 L_2) 的位置, 存在对 L_2 (或 L_1) 的一个旋转运动, 使得旋转后, L_1 和 L_2 对应的抽象的多面体 D_1 和 D_2 能够重合, 并且 L_1 和 L_2 每一个对应多边形所用的材料种类相同, 同时每一个对应角点的锁扣方式相同 (同为左手三叶锁扣或同为右手三叶锁扣). (2) **不包括手性, 是指在该等价定义下, 互为手性的两个多面体链环是等价的.** 具体定义如下, L_1 和 L_2 等价, 当且仅当固定 L_1 (或 L_2) 的位置, 存在对 L_2 (或 L_1) 的一个旋转运动, 或者镜像运动, 或者镜像运动和旋转运动的叠加, 使得运动后, L_1 和 L_2 对应的抽象多面体 D_1 和 D_2 能够重合, 并且此时 L_1 和 L_2 每一个对应多边形所用的材料种类相同, 同时每一个对应角点的锁扣方式相同. 值得注意的是, 在 (2) 的情形下, 左手三叶锁扣和右手三叶锁扣是互为镜像的. 本文将通过 Pólya 计数理论, 具体推导在这两种情形下的计数公式, 并给出三交叉正四面体、三交叉正六面

体、三交叉正十二面体链环计数结果.

Pólya 计数理论 (包括 Burnside 引理和 Pólya 基本计数定理及其推广) 是组合数学中最重要的理论之一. 1937 年, Pólya 在 Burnside 引理的基础上, 提出了后来以他名字命名的基本计数定理, 并利用它对烷烃和单取代烷烃的同分异构体进行计数, 见 [11]. 此后, 数学家们和化学家们对 Pólya 基本计数定理进行各种改造和推广, 计数了许多有机物的同分异构体, 见 [1-3, 9-10, 12-15, 17-18]. 本文也对 Burnside 引理和 Pólya 基本定理进行适当改造, 并据此计数不等价的三交叉多面体链环. 下面我们就先通过着色计数的语言对 Burnside 引理和 Pólya 基本计数定理进行阐述, 阐述的主要内容来自于曹汝成所编著的《组合数学》一书, 见 [5].

Burnside 引理和 Pólya 基本定理解决的是这样的着色计数问题: 用颜色集合 $U = \{u_1, u_2, \dots, u_m\}$ 对有限集 $X = \{1, 2, 3, \dots, n\}$ 每个元素进行任意着色, C_a 为全着色集, G 为 X 上的置换群, 求在置换群 G 的作用下的不等价的着色方案数 $N[G, C_a]$. G 对 C_a 的作用可看成是对全着色集 C_a 的置换. 而着色 c_1 和 c_2 等价, 当且仅当 c_1 可在 G 的作用下置换成 c_2 .

引理 1.1(Burnside 引理)[5] 上述着色计数问题中,

$$N[G, C_a] = \sum_{\pi \in G} |C_a(\pi)|.$$

其中, $C_a(\pi)$ 表示置换 π 的不变着色集.

有了 Burnside 引理, 求等价类的个数就转化成了求 G 中所有置换 π 的不变着色集的元素个数 $|C_a(\pi)|$ 之和的平均数. 而 Pólya 基本定理则给出 $|C_a(\pi)|$ 计算公式.

定理 1.2(Pólya 基本计数定理)[5] 上述着色计数问题中,

$$N[G, C_a] = \frac{1}{|G|} \sum m^{\sharp(\pi)} = P_G(m, \dots, m)$$

其中, $\sharp(\pi)$ 表示 π 的循环分解的个数. $P_G(y_1, \dots, y_n) = \frac{1}{|G|} \sum_{\pi \in G} y_1^{e_1} \cdots y_n^{e_n}$ 为 G 的循环指标.

Pólya 基本定理在求一般的置换群作用在全着色集求等价类的个数是十分有效的. 但对于更特殊的问题对应的着色计数问题, 则需要对它进行改造和推广. 在解决本文的计数问题中, 就需要对定理 1.2 进行改造. 关于 Burnside 引理和 Pólya 基本定理的详细阐述, 见 [5].

第 2 章 主要结果

本章我们运用 Pólya 计数理论给出了三交叉正多面体链环在包括手性和不包括手性两种情形下的计数理论和方法, 并就三交叉正四面体、三交叉正六面体及三交叉正十二面体链环给出了具体的计算结果.

2.1 三交叉多面体链环计数的一般理论和方法

2.1.1 包括手性情形

定义 2.1.1 如图 3(中) 和 3(右) 所示的交叉锁扣分别称之为 **左手三叶锁扣** 和 **右手三叶锁扣**.

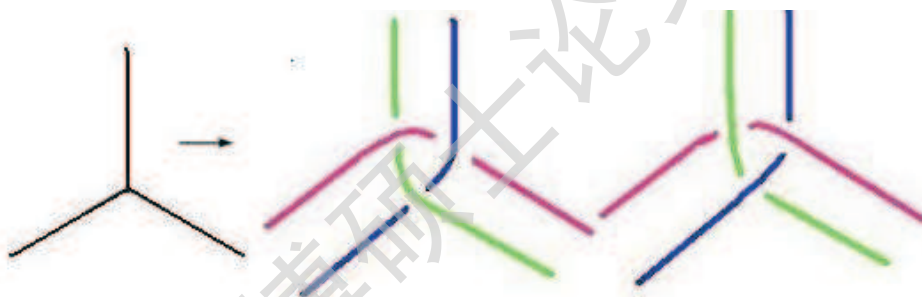


图 3 三度角点 (左)、左手三叶锁扣 (中)、右手三叶锁扣 (右)

定义 2.1.2 三交叉多面体链环 是指具有三正则多面体支架结构的链环, 其每一个面由一个单环构成, 在多面体的顶点处所关联的三个单环以锁扣方式 (包括左手三叶锁扣和右手三叶锁扣) 交叉结合在一起. 例如三交叉正四面体链环, 三交叉正六面体链环, 三交叉正十二面体链环, 见图 2.

在生物化学中, 常常用 DNA 或蛋白质分子材料做为链环的各个分支, 合成三交叉多面体链环.

定义 2.1.3 两个三交叉多面体链环 L_1 和 L_2 的, 若固定 L_1 (或 L_2), 存在对 L_2 (或者 L_1) 的一个旋转运动, 使得经过经过此旋转运动后, L_1 和 L_2 做为抽象多面体, 能够重合, 并且此时每个对应的面所用的分子材料相同, 同时, 每个对应的角点所用的锁扣方式也相同 (即同为左手或同为右手三叶锁扣), 则称 L_1 和 L_2 **等价 (包括手性)**.

问题 2.1.4(包括手性) 给定 m 种不同分子材料, 每种材料都足够多, 用其合成三交叉多面体链环, 每个角点可以采用左手或右手三叶锁扣两种方式. 求可以合成两两不等价 (包括手性) 的三交叉多面体链环数 N . 这里需要指出的是, 不论是左手或右手三叶锁扣, 都保证了相关联的三个分支不会被拉开, 这样, 对所有的角点任意分配左右手三叶锁扣时, 就保证了整个多面体链环不会被拉开. 因此, 我们提出的问题是有意義的.

我们将把问题 2.1.4(包括手性) 转化成着色计数问题, 先给出以下定义.

定义 2.1.5 先在空间中固定住刚体, 再对刚体进行旋转, 若旋转后, 刚体和旋转前的空间位置重合, 则称此旋转运动为 **重合旋转运动**.

定义 2.1.6 对于抽象多面体 D 来说, 每一个重合旋转运动, 都把 D 的每个角点和每个面得位置分别同时置换到其他角点和面的位置, 所以每个重合旋转运动都对应角点集合 V 和面集合 F 同时进行的一个置换, 称为多面体的 **旋转点面置换**.

定义 2.1.7 刚体的所有重合旋转运动构成的集合, 在运动的叠加运算下构成一个群, 称为重合旋转运动群, 简称 **旋转群** [6, 22].

定义 2.1.8 对于抽象多面体 D 的重合旋转运动群来说, 其相对应的所有旋转点面置换也构成了一个群, 称为 D 的重合旋转点面置换群, 简称 **旋转点面群**, 记为 $G[6, 22]$.

定义 2.1.9 X 为有限集, $F \subset X$, G 为 X 上的一个置换群, 若对任意的 $i \in F, \pi \in G, \pi(i) \in F$, 则称 G **可限制** 在 F 上.

可以看出, 若 G 可限制在 F 上, 则对任意的 $\pi \in G, \pi$ 的循环分解也可限制在 F 上.

定义 2.1.10 若有限集 X 有一个二划分, 即 $X = V \oplus F$, 设 $|V| = v, |F| = f, G$ 为 X 上的一个置换群, 并且 G 可同时限制在 F 和 V 上, 则令多项式 $P_G(y_1, \dots, y_v, z_1, \dots, z_f) = \frac{1}{|G|} \sum_{\pi \in G} y_1^{e_1} \cdots y_v^{e_v} z_1^{t_1} \cdots z_f^{t_f}$, 称为 G 在 $X = V \cup F$ **下的循环指标**. 其中, y_i 对应 π 在 V 上的长为 i 的循环, e_i 表示 π 在 V 中长为 i 的循环的个数, $i = 1, \dots, v$; z_j 对应 π 在 F 上的长为 j 的循环, t_j 表示 π 在 F 中长为 j 的循环的个数, $j = 1, \dots, f$. 记 $\sharp_V(\pi) = e_1 + \cdots + e_v, \sharp_F(\pi) = t_1 + \cdots + t_f$ 分别表示 π 在 V 和 F 上的 **循环分解的个数**.

在对有限集的二划分分别着色下情况下, Pólya 基本定理可改造成如下形式.

定理 2.1.11 若有限集 $X = V \oplus F, |V| = v, |F| = f, X$ 上的一个置换群 G 可同时限制在 F 和 V 上. 现用颜色集 $U^V = \{u_1^V, \dots, u_p^V\}$ 和颜色集 $U^F = \{u_1^F, \dots, u_q^F\}$ 分别对 V 和 F 进行着色, 设 C_a 为在此着色方式下的

全着色集, 则在群 G 作用下, C_a 的不等价的着色方案数

$$\begin{aligned} N[G, C_a] &= \frac{1}{|G|} \sum_{\pi \in G} p^{\sharp_V(\pi)} q^{\sharp_F(\pi)} \\ &= P_G(y_1, \dots, y_v, z_1, \dots, z_f) \big|_{y_1=\dots=y_v=p, z_1=\dots=z_f=q}. \end{aligned}$$

证明: 对任意的 $\pi \in G$, 由上述着色方式的定义可知, G 可作用于 $X = V \oplus F$, 由 Burnside 引理, $N[G, C_a] = \frac{1}{|G|} \sum_{\pi \in G} |C_a(\pi)|$. 而对任意的 $\pi \in G$, π 的每个循环要着相同的颜色, 因而 $|C_a(\pi)| = p^{\sharp_V(\pi)} q^{\sharp_F(\pi)}$, 从而 $N[G, C_a(\pi)] = \frac{1}{|G|} \sum_{\pi \in G} p^{\sharp_V(\pi)} q^{\sharp_F(\pi)} = P_G(y_1, \dots, y_v, z_1, \dots, z_f) \big|_{y_1=\dots=y_v=p, z_1=\dots=z_f=q}$. \square

用 V 和 F 分别表示多面体链环对应的顶点和面构成的集合, 把 m 种不同的分子材料构成的集合看成颜色集 U^F , 把左手三叶锁扣和右手三叶锁扣构成的集合看成颜色集 U^V . 若 $|V| = v, |F| = f$, 可设 $V = \{1, \dots, v\}, F = \{v+1, \dots, v+f\}, U^V = \{u_1^V, u_2^V\}, U^F = \{u_1^F, \dots, u_m^F\}$. 则问题 2.1.4(包括手性) 可转化成着色计数问题: 用着色集 U^F 和 U^V 分别对三正则多面体 D 的面集 F 和顶点集 V 的各元素进行着色, 求在重合旋转点面置换群 G 的作用下不等价的着色方案数 $N[G, C_a]$, 即 $N = N[G, C_a]$. 其中 C_a 表示对顶点和面分别着色的全着色集, 等价即为通常意义下的着色等价 [5]. 令 $X = V \oplus F$, 由上述的讨论可知, X 上的置换群 G 可同时限制在 F 和 V 上. 由定理 2.1.11, 可直接求出 $N[G, C_a]$ 即 N 的计数公式.

定理 2.1.12 问题 2.1.4(包括手性) 的解

$$\begin{aligned} N &= N[G, C_a] \\ &= \frac{1}{|G|} \sum_{\pi \in G} 2^{\sharp_V(\pi)} m^{\sharp_F(\pi)} \\ &= P_G(y_1, \dots, y_v, z_1, \dots, z_f) \big|_{y_1=\dots=y_v=2, z_1=\dots=z_f=m} \end{aligned}$$

其中 G 为对应的三正则多面体的旋转点面群, $P_G(y_1, \dots, y_v, z_1, \dots, z_f)$ 为 G 在 $X = V \oplus F$ 上的循环指标.

证明: 由定理 2.1.11 可直接得出. \square

2.1.2 不包括手性情形

定义 2.1.13 空间中固定住刚体 L 和镜面 M , L 在镜面中反射成像, 把从 L 到 L' 的运动称为 **镜像运动**.

在镜像运动中, 刚体 L 的镜像 L' 也视为刚体. 对于三交叉多面体链环, 左(右)手三叶锁扣方式经过镜像运动后变成了右(左)手三叶锁扣, 如图 4 所示.

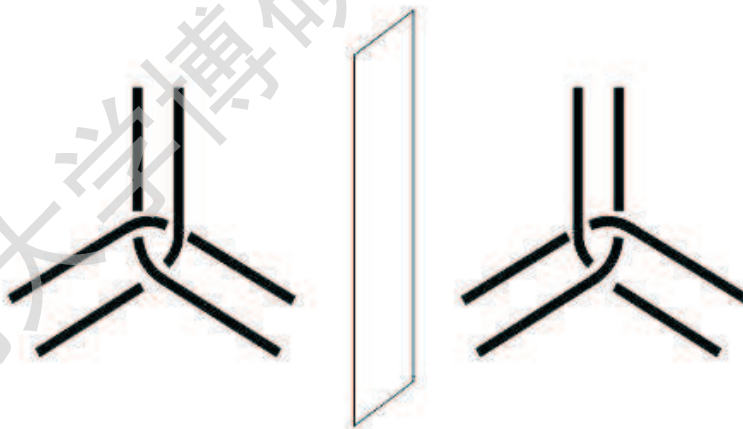


图 4 左手三叶锁扣和右手三叶锁扣互为镜像

定义 2.1.14 对于三交叉多面体链环 L_1 和 L_2 , 若固定 L_1 (或者 L_2), 存在对 L_2 (或者 L_1) 的一个旋转运动, 或镜像运动, 或旋转运动和镜像运动的

Degree papers are in the “[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)”. Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库